

Eigenschaften des Random Walks in ein- zwei- und drei Dimensionen

Advanced

			Eindimensional	Zweidimensional	Dreidimensional
(1)	Wahrscheinlichkeitsdichte Teilchen nach N Sprüngen bei (x,y,z) zu finden mit Sprungweite "1".	$w(x,y,z) =$	$\left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N}$	$\left(\frac{1}{2\pi N}\right) \cdot \exp - \frac{x^2 + y^2}{2N}$	$\left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{3/2} \cdot \exp - \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2N}$
(2)	Breite auf 0,607 facher (= $e^{-1/2}$) Höhe = 2σ		$\sigma_x = N_x^{1/2}$	$\sigma_x = N_x^{1/2}$ $\sigma_y = N_y^{1/2}$	$\sigma_x = N_x^{1/2}$ $\sigma_y = N_y^{1/2}$ $\sigma_z = N_z^{1/2}$
(2a)	Damit: "Normaldarstellung" von (1)	$w(x,y,z) =$	$\left(\frac{1}{2\sigma^2\pi}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2\sigma^2}$	$\left(\frac{1}{2\sigma^2\pi}\right) \cdot \exp - \frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}$	$\left(\frac{1}{2\sigma^2\pi}\right)^{3/2} \cdot \exp - \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}$
(3)	Volumenelement ΔV bei Übergang zu Abständen r	$\Delta V =$	$2\Delta r$ <i>(der Faktor 2 ist wichtig!)</i>	$2\pi r \Delta r$	$4\pi r^2 \Delta r$
(4)	Absolute Wahrscheinlichkeit $W(r)$, Teilchen im Abstandsintervall $r, r + \Delta r$ zu finden mit dimensionloser Sprungweite "1" $W'(r)$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte bezogen auf Abstände	$W(r) =$ $w(r)\Delta V$ $=W'(r)\Delta r$	$\left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$	$\left(\frac{r}{N}\right) \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$	$\frac{2r^2}{N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$
(5)	Absolute Wahrscheinlichkeit Teilchen im Abstandsintervall $r, r + \Delta r$ zu finden mit Sprungweite a_0 cm	$W(r,a_0) =$ $w(r,a_0)\Delta V$ $=W'(r)\Delta r$	$\left(\frac{2}{a_0^2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2Na_0^2} \cdot \Delta r$	$\left(\frac{r}{Na_0^2}\right) \cdot \exp - \frac{r^2}{2Na_0^2} \cdot \Delta r$	$\frac{2r^2}{a_0^3 \cdot N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2Na_0^2} \cdot \Delta r$
(6)	Mittleres Verschiebungswadrat $\langle r^2 \rangle = \int r^2 W'(r,a_0) dr$ (mit Sprungweite a_0 cm) = Diffusionslänge L	$\langle r^2 \rangle =$	$N \cdot a_0^2$	$2N \cdot a_0^2$	$3N \cdot a_0^2$
(6a)	Diffusionslänge $L = \{\langle r^2 \rangle\}^{1/2}$	$L =$	$a_0 N^{1/2}$	$a_0 (2N)^{1/2}$	$a_0 (3N)^{1/2}$
(7)	Mittleres Verschiebungswadrat mit dimensionloser Sprungweite "1"	$\langle r^2 \rangle =$	N	$2N$	$3N$
(8)	Wahrscheinlichstes r_{wahr} aus $dW/dr(r_{\text{wahr}}) = 0$ (mit Sprungweite " a_0 ")	$r_{\text{wahr}} =$	0	$a_0 \cdot N^{1/2}$	$a_0 (2N)^{1/2}$ siehe auch den Link

Erklärungen und Mathematik

1. Sprungweiten

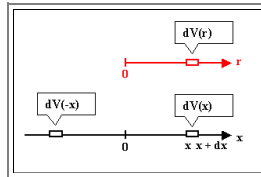
- Solange wir nur Würfelspiele betrachten, gibt es keine Sprungweiten. Assoziieren wir das gewürfelte Ergebnis mit der Bewegung von irgendetwas ("bei +1 eins nach rechts, bei -1 eins nach links"), haben wir die dimensionlose Spurngweite "1"
- Ist die Sprungweite jedoch eine physikalische Größe, d.h. zum Beispiel a_0 cm, müssen wir a_0 wie folgt in die Formel einbauen
 - r [Zahl] wird ersetzt durch r/a_0
 - dr [Zahl] wird ersetzt durch $1/a_0 \cdot dr$
- Es ist erkennbar sehr wichtig, auch beim dr das $1/a_0$ nicht zu vergessen!

2. "Halb"wertsbreite

- Die Breite der Gaußkurve auf "ungefähr" halber Höhe heißt 2σ , hat einen besonders einfachen Wert (und markiert die Wendepunkte der Kurve).
- Häufig benutzt man den numerischen Wert für σ als ein Maß für die Streuung eines Parameters, z.B. bei Meßwerten, die einer Gaußverteilung gehorchen.
- Unter Benutzung von σ lassen sich die Funktionen einfacher schreiben, man spricht von der Normalform der Gaußverteilung.

3. Volumenelement

- Wir beziehen uns nur auf **Abstände**. Die Volumenelemente sind dann
 - Eindimensional**: Das Intervall $r, + dr$ auf der Abstandsachse r
 - Zweidimensional**: Die Fläche zwischen den Kreisen mit Radius r und $r + dr$ -ein Ringsegment
 - Dreidimensional**: Das Volumen zwischen den Kugeln mit mit Radius r und $r + dr$ - ein Kugelsegment oder eine **"Zwiebelschale"**
- Ein beliebiger Fehler beim Übergang von cartesischen Koordinaten zu Polarkoordinaten für den **ein**dimensionalen Fall liegt im Übersehen des Faktors "2" in der Beziehung $dV = 2 dr$, den **ein** Wert für $r = |x|$ deckt sowohl den Wert $+x$ als auch $-x$ ab, wie die nachfolgende Zeichnung klar macht.



- Es gibt keine negativen Abstände und damit keine negativen r . Teilchen die sich im "Volumen"element bei x oder bei $-x$ befinden, sind alle im Volumenelement bei $r = |x|$.
- Der hier eventuell einfließende Fehler mag sich kompensieren (oder verstärken?), wenn man einen anderen Faktor 2 Fehler macht, indem man Standardlösungen der Fickschen Diffusionsgleichungen, die fast immer für einen Halbraum gegeben werden (d.h. aus der Quelle diffundieren die Teilchen nur nach links **oder** nur nach rechts; die Quelle sitzt auf der Oberfläche), mit den Random walk Ergebnissen vergleicht, bei denen die Teilchen nach rechts **und** nach links diffundieren können (die Quelle sitzt im Inneren).

4. und 5. Absolute Wahrscheinlichkeit und Wahrscheinlichkeitsdichten

- Die **absolute** Wahrscheinlichkeit für irgendetwas muß sich immer auf ein endliches (wenn auch differentiell kleines) Volumen beziehen. Denn die absolute Wahrscheinlichkeit, eine **endliche** Anzahl von irgendetwas bei einem von **unendlich** viel mathematischen Punkten zu finden ist immer = 0.
- Sind die Variablen in Wahrheit diskret (z.B. beim Würfelspiel, wo man schlicht keine **3,27** oder **7,005** würfeln kann), muß man immer die **Wahrscheinlichkeitsdichte** über das Intervall um die diskrete Variable herum integrieren. Die Wahrscheinlichkeit eine **7** zu würfeln ist dann beispielsweise

$$w(7) = \int_{6,5}^{7,5} w(r) \cdot dV$$

- Die angegebene Formel erhält man also einfach durch Multiplikation der Formeln in Reihe 1 mit den Formeln in Reihe 3.
- Nach der Umrechnung auf Wahrscheinlichkeiten für **Abstände** übernimmt $W'(r) = W(r)/\Delta r$ die Rolle der Wahrscheinlichkeitsdichte - es ist jetzt eine **radiale Wahrscheinlichkeitsdichte**.

6. Mittleres Verschiebungsquadrat mit Sprungweite a_0

- Diese Integrale können leicht berechnet werden indem man sie auf eine Form bringt, die in Tabellen zu finden ist. Der jeweilige Wert des Integrals ist in der Formel durch **rote Schrift** immer getrennt ausgewiesen.

Eindimensional

- Wir haben für das mittlere Verschiebungsquadrat

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{2}{a_0^2 \pi N} \right)^{1/2} \cdot \int_0^{\infty} r^2 \cdot \exp - k \cdot r^2 \cdot dr = \left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N} \right)^{1/2} \cdot \frac{\pi^{1/2}}{2k^{3/2}}$$

- Mit $k = 1/2Na_0^2$ erhalten wir

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N} \right)^{1/2} \cdot N \cdot a_0^3 \cdot \left(2\pi \cdot N \right)^{1/2} = N \cdot a_0^2$$

Zweidimensional

- Wir haben für das mittlere Verschiebungsquadrat

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{1}{N \cdot a_0^2} \right) \cdot \int_0^{\infty} r^3 \cdot \exp - k \cdot r^2 \cdot dr = \left(\frac{1}{N \cdot a_0^2} \right) \frac{1}{2k^2}$$

- Mit

$$k = \frac{1}{2 \cdot N \cdot a_0^2} ; \quad \frac{1}{2k^2} = \frac{4 \cdot N^2 \cdot a_0^4}{2} = 2 \cdot N^2 \cdot a_0^4$$

Damit ergibt sich

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{N \cdot a_0^2} \cdot 2N^2 \cdot a_0^4 = 2N \cdot a_0^2$$

Dreidimensional

$$\langle r^2 \rangle = \frac{2}{a_0^3 \cdot N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi \cdot N} \right)^{1/2} \cdot \int_0^\infty r^4 \cdot \exp - k \cdot r^2 \cdot dr$$

Mit

$$k = \frac{1}{2N \cdot a_0^2} \quad \text{und} \quad \int_0^\infty = \frac{3\pi^{1/2}}{8 \cdot k^{5/2}} = \frac{3\pi^{1/2} \cdot (2N \cdot a_0^2)^{5/2}}{8}$$

erhalten wir

$$\langle r^2 \rangle = 3 \cdot a_0^2 \cdot N$$

Es ist immer gut, mal die Integration zu üben, *aber das ganze hätte man natürlich auch einfacher haben können:*

Da die Hüpfle in x -, y - and z -Richtung unabhängig voneinander sind, und deshalb $N_x = N_y$ sein muß, gilt

$$\begin{aligned} \langle r^2(x,y) \rangle &= \langle r^2(x) \rangle^2 + \langle r^2(y) \rangle^2 \\ &= (N_x a_0^2) + (N_y a_0^2) \\ &= 2N a_0^2 \end{aligned}$$

Für den dreidimensionalen Fall folgt entsprechend

$$\langle r^2(x,y) \rangle = 3 \cdot N \cdot a_0^2$$

Unnötige Arbeit gemacht? Nein - nur dadurch läßt sich prüfen, ob die Ausgangsformeln stimmen (so wurden die diversen Fehler in Büchern entdeckt).

7. Mittleres Verschiebungsquadrat mit Sprungweite "1"

Das ist jetzt einfach: Ersetzen wir $N \cdot a_0^2$ in den Formeln in 6. durch N , ist die Mathematik identisch - d.h. wir müssen bei $\langle r^2 \rangle$ nur N statt $N \cdot a_0^2$ einsetzen.

8. Wahrscheinlichstes r

Der wahrscheinlichste Abstand r_{wahr} ist der Abstand, bei dem wir erwarten können die *meisten* Teilchen zu finden. Daß das nicht derselbe Abstand ist wie der *mittlere* Abstand

$\langle r \rangle = \{ \langle r^2 \rangle \}^{1/2}$ wurde schon [anderweitig klargemacht](#).

r_{wahr} ergibt sich offensichtlich aus dem Maximum der Verteilungskurve, d.h. wir haben

$$\frac{dw}{dr} (r = r_{\text{wahr}}) = 0$$

Wir bekommen:

Eindimensional:

$$\left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N}\right)^{1/2} \cdot \frac{d}{dr} \left(\exp - \frac{r^2}{2Na_0^2} \right) = \left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N}\right)^{1/2} \cdot - \left(\frac{r}{Na_0^2}\right) \cdot \exp - \frac{r^2}{2 \cdot N \cdot a_0^2} = 0$$

● Und damit ganz schnell

$$r_{\text{wahr}} = 0$$

▀ *Zweidimensional*

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{r}{N \cdot a_0^2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2 \cdot N \cdot a_0^2} \right) = 0$$

● Und damit

$$r_{\text{wahr}} = a_0 \cdot N^{1/2}$$

▀ *Dreidimensional*

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{2r^2}{a_0^3 \cdot N} \left(\frac{1}{2\pi \cdot N}\right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{r^2}{2 \cdot N \cdot a_0^2} \right) = 0$$

● Und damit

$$r_{\text{wahr}} = a_0 \cdot (2N)^{1/2}$$

▀ Während r_{wahr} und der Mittelwert von r , also die Diffusionslänge L , bei eindimensionaler Diffusion fundamental verschieden sind, ist der Unterschied für dreidimensionale Diffusion vernachlässigbar. Für Diffusion in hohen Dimensionen - was immer das sein mag - wird der Unterschied offenbar immer kleiner.